Stars-2025-AtomData004

Исследование неупругих процессов, происходящих при столкновениях серебра и водорода

Светлана А. Яковлева[1] , Вера А. Васильева[1]

[1] Herzen State Pedagogical University of Russia, Russia

cvetaja@gmail.com

В работе рассчитаны сечения и константы скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и ионов серебра с атомами и ионами водорода, учитывающие тонкую структуру уровней атома серебра. В рассмотрение включены 11 ковалентных состояний Ag+H и одно ионное состояние $Ag^+ + H^-$, обладающих 0^+ молекулярной симметрией. Асимптотический подход, учитывающий тонкую структуру [1], использован для моделирования электронных адиабатических потенциальных энергий высоколежащих состояний, в то время как для низколежащих состояний использованы данные точных квантово-химических расчетов из работы [2]. Расчеты неадиабатической ядерной динамики выполнены в рамках многоканальной модели Ландау-Зинера: аналитические выражения использованы для оценки вклада ионно-ковалентного взаимодействия в сечения неупругих процессов, метод ветвящихся токов вероятности применен для учета областей неадиабатичности на малых расстояниях. Рассчитаны сечения и константы скоростей неупругих процессов возбуждения, де-возбуждения, взаимной нейтрализации и образования ионной пары.

[1] A. K. Belyaev, Y. V. Voronov, S. A. Yakovleva. Physical Review A 100 (2019) 062710.

[2] Z. Mohammadian, F. Nourigheimasi, A. Maghari, A. Shayesteh. Chemical Physics Letters 849 (2024) 141418

This research has been supported by:

1. "Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена", grant 46-VG